

Ramanova optická aktivita (ROA) je moderní spektroskopická metoda, kterou lze s úspěchem aplikovat na celou řadu chirálních vzorků, od malých organických molekul až po komplexní biomolekulární systémy. K důležitým aplikacím ROA patří studium struktury peptidů a proteinů v roztoku. Cílem diplomové práce bylo nalézt a ověřit vztah mezi trojrozměrnou strukturou a Ramanovou optickou aktivitou disulfidové a amidové skupiny v peptidech. V ROA spektrech poly(Pro-Gly-Pro), oxytocinu a hinge peptidu s navázanou antigenní sekvencí byly nalezeny charakteristické znaky konformace polyprolin II (levotočivého 31-helixu). U modelových cyklodextrinových struktur přemostěných disulfidovými můstky byl v ROA spektrech pozorován signál v oblasti S-S a C-S valenčních vibrací. V ROA spektru oxytocinu (peptid s jedním S-S můstkem) byl nalezen pozitivní ROA signál v oblasti S-S valenčních vibrací, který je podle teoretických výpočtů na modelových disulfidech indikátorem kladného dihedrálního úhlu C-S-S-C. Tento výsledek je ve shodě s krystalovou strukturou. Zabývali jsme se také rozšířením měření ROA spekter do oblasti valenčních vodíkových vibrací (2500-3200  $\text{cm}^{-1}$ ).